

(19) 世界知的所有権機関  
国際事務局(43) 国際公開日  
2005年3月31日 (31.03.2005)

PCT

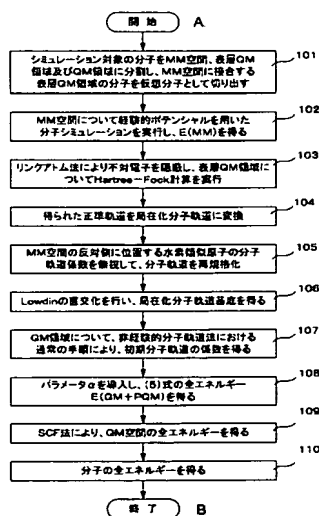
(10) 国際公開番号  
WO 2005/029385 A1

- (51) 国際特許分類<sup>7</sup>: G06F 19/00
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2004/013808
- (22) 国際出願日: 2004年9月22日 (22.09.2004)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:  
特願2003-329751 2003年9月22日 (22.09.2003) JP
- (71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): 日本電気株式会社 (NEC CORPORATION) [JP/JP]; 〒1088001 東京都港区芝五丁目7番1号 Tokyo (JP). 国立大学法人大阪大学 (OSAKA UNIVERSITY) [JP/JP]; 〒5650871 大阪府吹田市山田丘1番1号 Osaka (JP).
- (72) 発明者; および
- (75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 米澤 康滋 (YONEZAWA, Yasushige) [JP/JP]; 〒5650875 大阪府吹田市青山台4-1-C74-305 Osaka (JP). 高田 俊和 (TAKADA, Toshikazu) [JP/JP]; 〒1088001 東京都港区芝五丁目7番1号 日本電気株式会社内 Tokyo (JP). 中田 一人 (NAKATA, Kazuto) [JP/JP]; 〒1088001 東京都港区芝五丁目7番1号 日本電気株式会社内 Tokyo (JP). 佐久間 俊広 (SAKUMA, Toshihiro) [JP/JP]; 〒1088001 東京都港区芝五丁目7番1号 日本電気株式会社内 Tokyo (JP). 中村 春木 (NAKAMURA, Haruki) [JP/JP]; 〒5650854 大阪府吹田市桃山台2-7-D14-206 Osaka (JP).
- (74) 代理人: 宮崎 昭夫, 外 (MIYAZAKI, Teruo et al.); 〒1070052 東京都港区赤坂1丁目9番20号 第16興和ビル8階 Tokyo (JP).

[続葉有]

(54) Title: MOLECULE SIMULATION METHOD AND DEVICE

(54) 発明の名称: 分子シミュレーション方法及び装置



A..START

101..DIVIDE MOLECULE TO BE SIMULATED INTO MM SPACE, SUPERFICIAL QM REGION, AND QM REGION AND CUT OUT MOLECULE IN SUPERFICIAL QM REGION IN JUNCTION WITH MM SPACE, AS VIRTUAL MOLECULE

102..EXECUTE MOLECULE SIMULATION USING EMPIRICAL POTENTIAL FOR MM SPACE AND OBTAIN E(MM)

103..CONCEAL NON-PAIR ELECTRON BY LINK ATOM METHOD AND EXECUTE HARTREE-FOCK CALCULATION FOR SUPERFICIAL QM REGION

104..CONVERT OBTAINED NORMAL ORBITAL INTO LOCALIZED MOLECULAR ORBITAL

105..IGNORE MOLECULAR ORBITAL COEFFICIENT OF HYDROGEN-SIMILAR ATOM POSITIONED OPPOSITE TO MM SPACE AND RENORMALIZE MOLECULAR ORBITAL

106..EXECUTE LOWDIN ORTHOGONALIZATION AND OBTAIN LOCALIZED MOLECULAR ORBITAL BASE

107..OBTAIN COEFFICIENT OF INITIAL MOLECULAR ORBITAL BY ORDINARY PROCEDURE IN NON-EMPIRICAL MOLECULAR ORBITAL METHOD FOR QM REGION

108..INTRODUCE PARAMETER A AND OBTAIN ALL ENERGY E(QM+PQM) OF EQUATION (5)

109..OBTAIN ALL ENERGY OF QM SPACE BY THE SCF METHOD

110..OBTAIN ALL ENERGY OF MOLECULE

B..END

(57) Abstract: There is provided a molecule simulation method for dividing a molecule or a part of molecule to be simulated into a QM space and an MM space and applying a non-empirical molecular orbital method to the QM space and a method based on an empirical potential to the MM space. The molecule simulation method includes a step for acquiring structure data on the molecule or part of molecule to be simulated from a storage section and dividing it into the QM space and the MM space and a step for replacing a part of all energy-expressing equation in the non-empirical molecular orbital method concerning the QM space with an empirical potential.

(57) 要約: シミュレーション対象の分子または分子の一部をQM空間とMM空間とに分割し、QM空間に対して非経験的分子軌道法を適用し、MM空間に対しては経験的ポテンシャルに基づく方法を適用して分子シミュレーションを行う分子シミュレーション方法は、記憶部から、シミュレーション対象の分子または分子の一部を構造データを取り出してQM空間及びMM空間に分割する段階と、QM空間に関する非経験的分子軌道法における全エネルギー表式の一部を経験的ポテンシャルで置き換える段階と、を有する。

WO 2005/029385 A1



(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY,

KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:  
— 国際調査報告書

2文字コード及び他の略語については、定期発行される各PCTガゼットの巻頭に掲載されている「コードと略語のガイダンスノート」を参照。